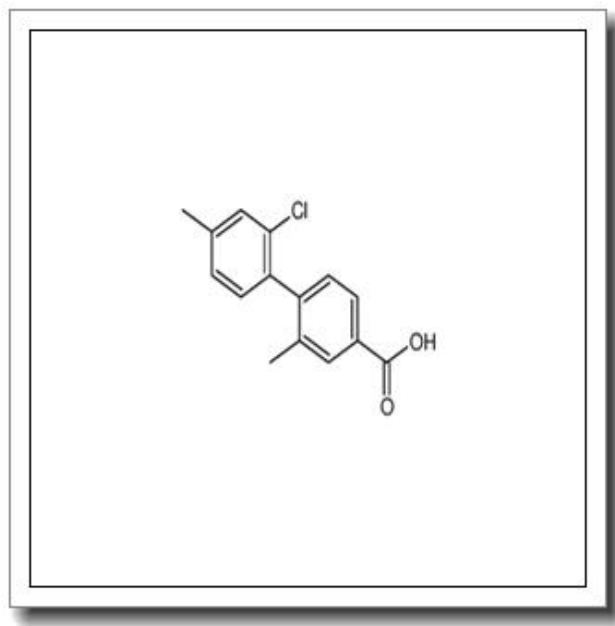


2-氯-2,4-二甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸

4-(2-chloro-4-methylphenyl)-3-methylbenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(2-chloro-4-methylphenyl)-3-methylbenzoic acid
中文名称	2-氯-2,4-二甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸
CAS 号	1261978-68-0
分子式	C ₁₅ H ₁₃ ClO ₂
分子量	260.716
纯度	≥96%

产品说明

4-(2-氯-4-甲基苯基)-3-甲基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(2-chloro-4-methylphenyl)-3-methylbenzoic acid, 中文系统命名为 2-氯-2,4-二甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸, CAS 登记号为 1261978-68-0。其分子式为 C₁₅H₁₃ClO₂, 分子量 260.716, 常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%。该化合物属于芳香族羧酸衍生物, 结构中含氯代甲基联苯骨架, 具有显著的疏水性和刚性平面特征, 在有机溶剂如甲醇、二甲基亚砷中溶解性良好。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸类化合物的结构修饰体, 其氯代甲基基团可增强分子与生物受体的疏水相互作用, 而羧酸基团提供了潜在的氢键结合位点。这种特殊结构使其在药物化学中作为中间体具有重要价值, 尤其适用于设计靶向酶活性位点或蛋白质结合域的小分子抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- (1) 医药研发: 作为关键中间体用于合成抗炎、抗肿瘤等活性化合物的结构修饰;
- (2) 材料科学: 用于制备液晶材料或高分子聚合物的功能单体;
- (3) 农药化学: 作为除草剂或杀菌剂的先导化合物优化模板。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃避光干燥环境下密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免吸湿, 配制溶液时应优先选用无水级有机溶剂。实验操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 重金属含量 <10ppm。安全数据表明其具有刺激性,

操作时应佩戴防护手套及护目镜。若不慎接触眼睛，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

注：具体应用建议需结合实验体系进行优化，更多技术参数可索取 COA 报告。